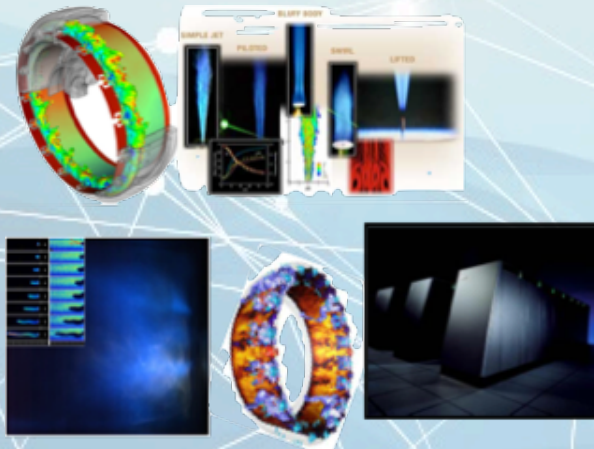


## Simulation aux Grandes Echelles des écoulements réactifs et application en pétrochimie



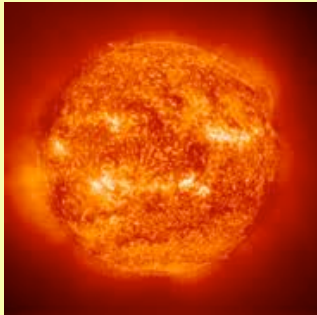
B. Cuenot  
Groupe CFD:

L. Gicquel, O. Vermorel, G. Staffelbach,  
E. Riber, A. Dauplain, F. Duchaine

# Les écoulements réactifs

- ◆ ... sont présents dans de nombreux systèmes, naturels ou industriels

## *Astrophysique*



## *Atmosphère*

### *Volcans*



### *Feux*

## *Bio-mécanique*



## *Hydrologie*



# Les écoulements réactifs

- ◆ ... sont présents dans de nombreux systèmes, naturels ou industriels

## Energie



Chimie



Fours



Pollution

## Transport



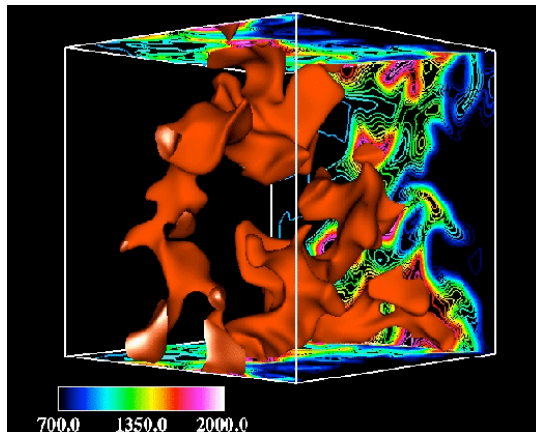
Moteurs

# Turbulence et chimie

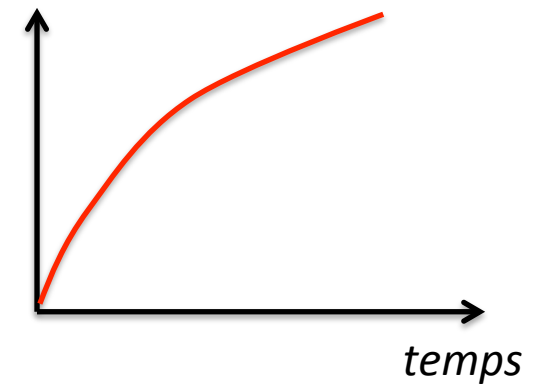
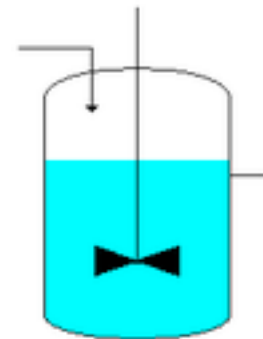
- ◆ Tous ces écoulements ont un commun un caractère turbulent qui contrôle le mélange et donc la chimie

$\tau_c$  temps chimique  
 $\tau_t$  temps turbulent

$\tau_c \ll \tau_t$  : interaction forte  
Résolution de la turbulence 3D



$\tau_c \gg \tau_t$  : interaction faible  
réacteur homogène 0D



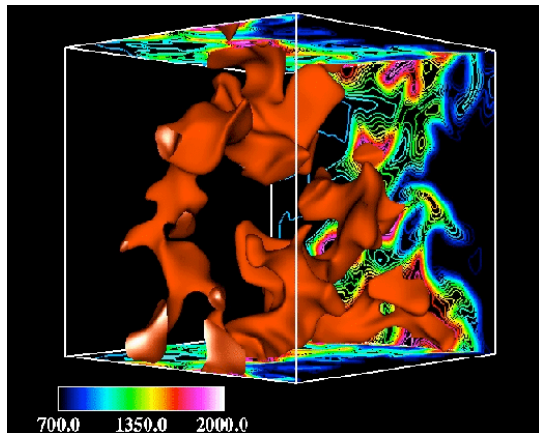
# Turbulence et chimie

- ◆ Tous ces écoulements ont un commun un caractère turbulent qui contrôle le mélange et donc la chimie

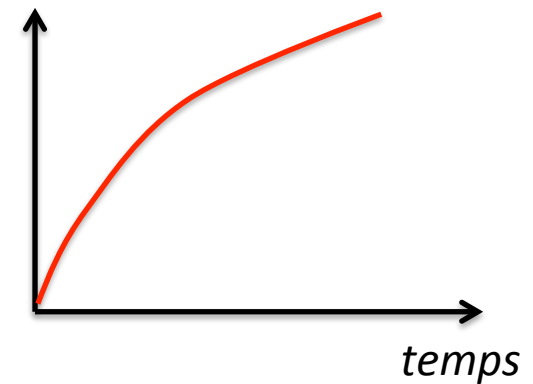
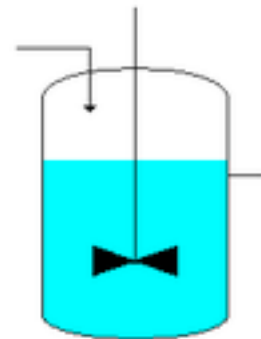
$\tau_c$  temps chimique

$\tau_t$  temps turbulent

$\tau_c \ll \tau_t$  : interaction forte  
Résolution de la turbulence 3D



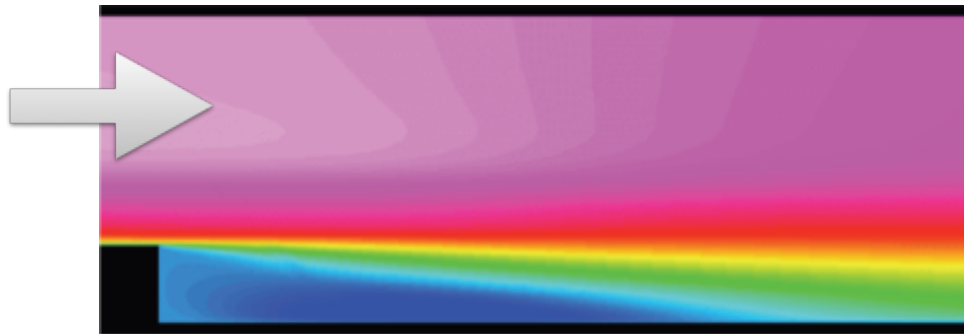
$\tau_c \gg \tau_t$  : interaction faible  
réacteur homogène 0D



# Simulation des écoulements turbulents

## ◆ RANS / LES / DNS

Exemple : écoulement derrière une marche



Source: Rémy Fransen, 3<sup>rd</sup> INCA colloquium, ONERA, Toulouse (2011)

### **RANS:**

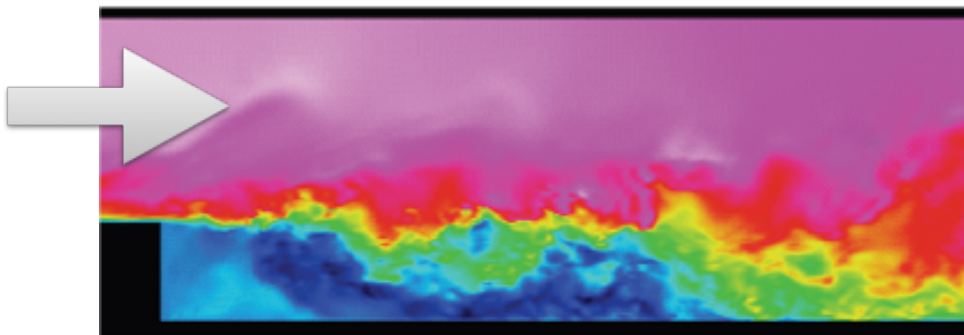
- champs moyens, stationnaires
- coût calcul très faible
- turbulence modélisée

### **LES:**

- champs physiques filtrés, instationnaires
- coût calcul élevé
- turbulence sous-maille modélisée

### **DNS:**

- champs physiques exacts, instationnaires
- coût calcul très élevé
- turbulence résolue

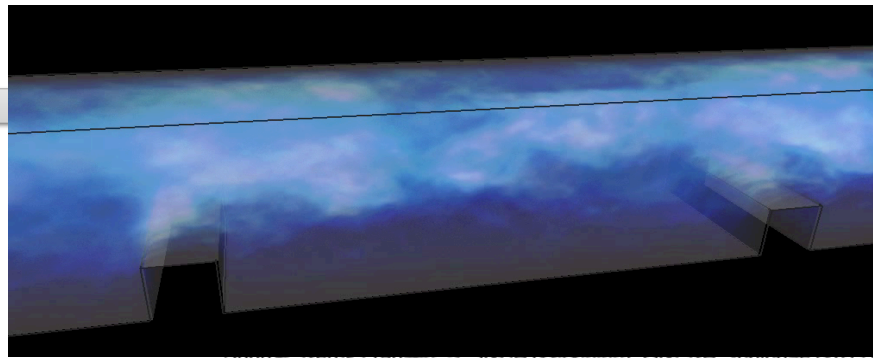


Source: Rémy Fransen, 3<sup>rd</sup> INCA colloquium, ONERA, Toulouse (2011)

# Simulation des écoulements turbulents

## ◆ RANS / LES / DNS

Exemple : écoulement derrière une marche

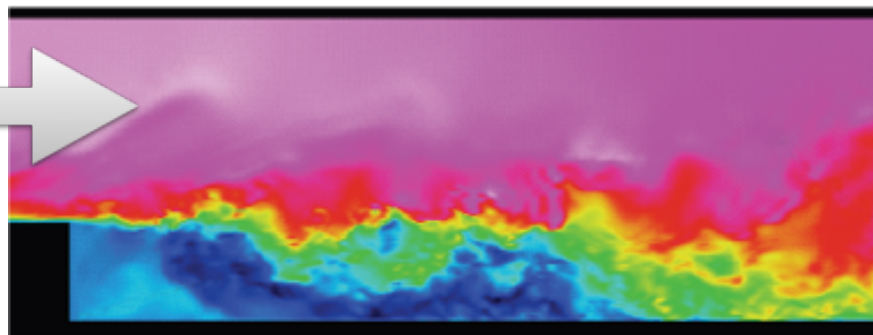


### **RANS:**

- champs moyens, stationnaires
- coût calcul très faible
- turbulence modélisée

### **LES:**

- champs physiques filtrés, instationnaires
- coût calcul élevé
- turbulence sous-maille modélisée



### **DNS:**

- champs physiques exacts, instationnaires
- coût calcul très élevé
- turbulence résolue

Source: Rémy Fransen, 3<sup>rd</sup> INCA colloquium, ONERA, Toulouse (2011)

# Outils et HPC

## AVBP – An unstructured LES solver *Jointly developed by IFP-EN and CERFACS*

- ◆ External, internal flows
- ◆ Fully compressible turbulent reacting flows (ideal & real gas thermo.)
- ◆ DNS / LES approach
  
- ◆ Unstructured hexaedral, tetraedral, prisms & hybrid meshes
- ◆ Massively parallel, SPMD approach
- ◆ Explicit in time
- ◆ Centered schemes
  - Finite Volumes / Finite Elements (2<sup>nd</sup>/3<sup>rd</sup> order<sup>a</sup>)
  
- ◆ SGS models : Smagorinsky(dynamic)/WALE<sup>b</sup>
- ◆ NSCBC<sup>c</sup> boundary cond. + wall laws
- ◆ Reduced<sup>d</sup> or tabulated<sup>e</sup> chemical kinetics
- ◆ Thickened flame turb. combustion model (TFLES)<sup>f</sup>
- ◆ Multi-phase solvers (Lagrangian & Eulerian)

<sup>a</sup>Colin O. & Rudgyard M., *Journal Comp. Physics*, 2000

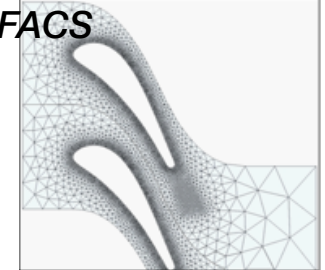
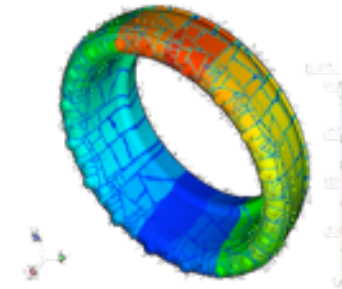
<sup>b</sup>Nicoud F. & Ducros F., *Flow, Turb. Combustion*, 1999

<sup>c</sup>Poinsot T. & Lele S., *Journal Comp. Physics*, 1992

<sup>d</sup>Franzelli B. et al., *Combust. Flame*, 2010

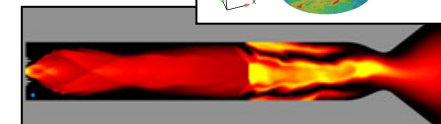
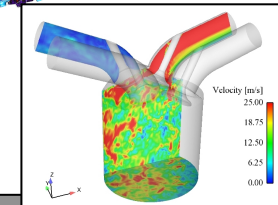
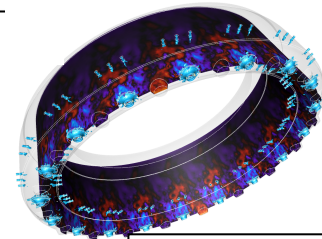
<sup>e</sup>Fiorina B. et al., *Combust. Flame*, 2010

<sup>f</sup>Colin O. et al. *Physics of Fluids*, 2000



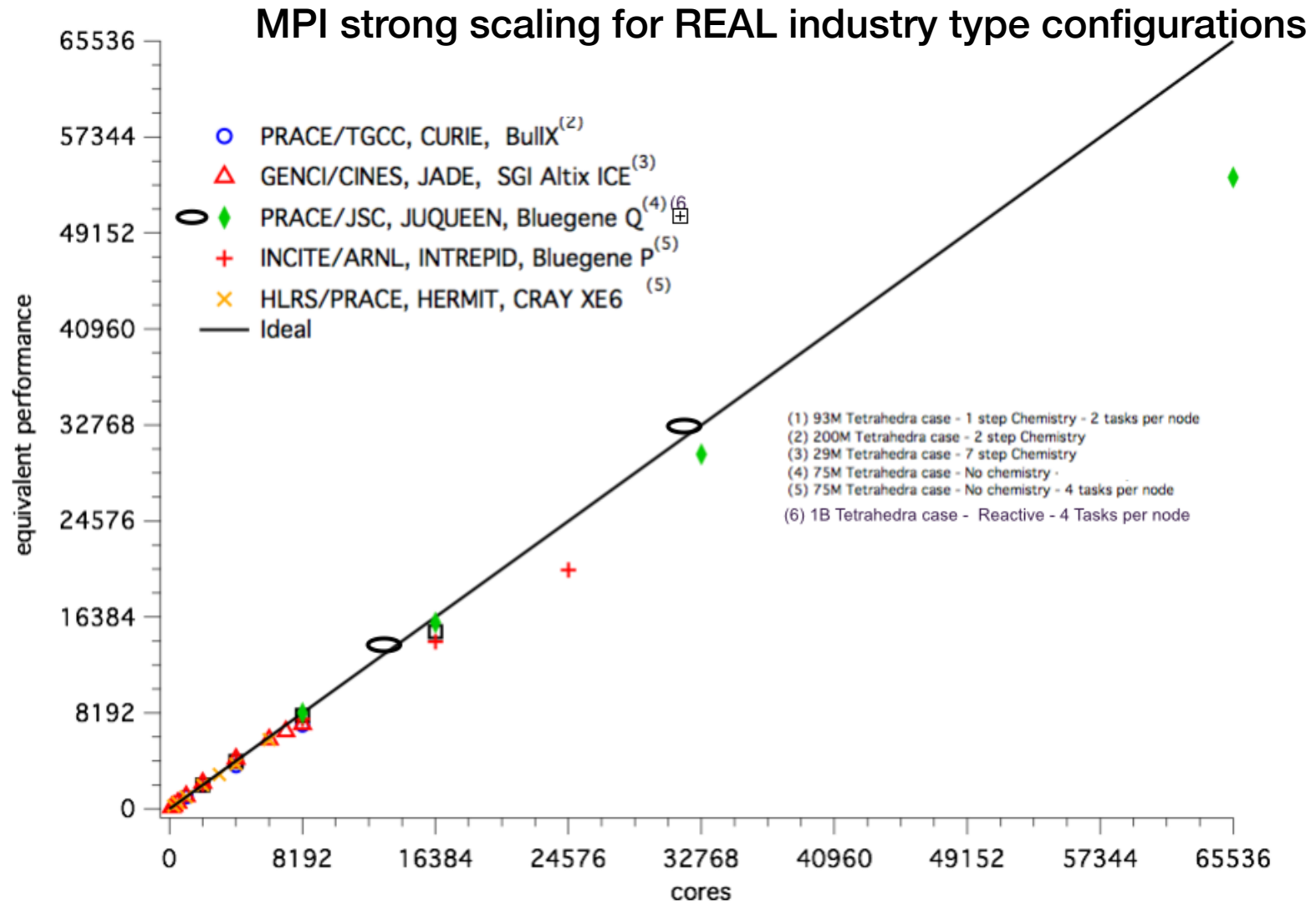
## Applications

- ◆ Gas turbines
- ◆ Aeronautical engines
- ◆ Piston engines
- ◆ Statoreactor
- ◆ Rocket engines
- ◆ Furnaces
- ◆ Heat exchangers





# Outils et HPC

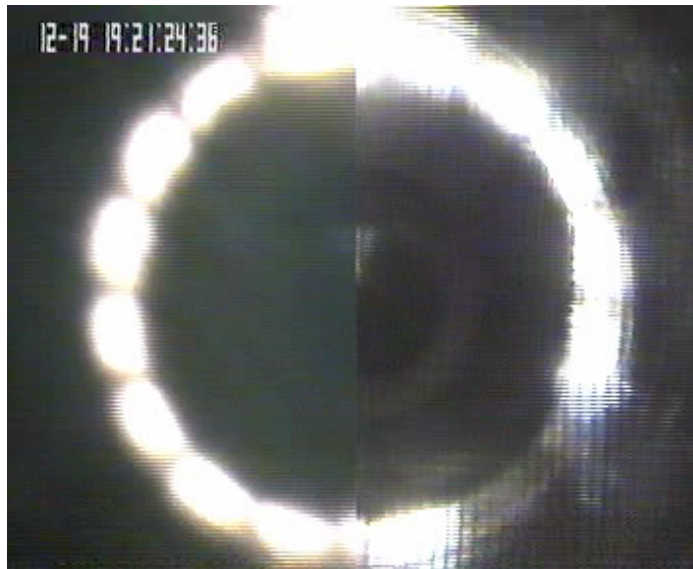


# Un exemple: la combustion turbulente

## ◆ L'allumage moteur est de première importance...!

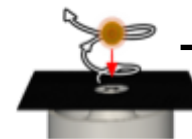
### Moteurs aéronautiques:

- Conception (nombre d'injecteurs, volume zone primaire)
- Allumage sécurisé dans toutes les conditions (rallumage en altitude)



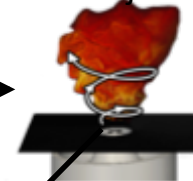
#### Phase I

deposit near  
one injector



#### Phase II

flame on  
one injector



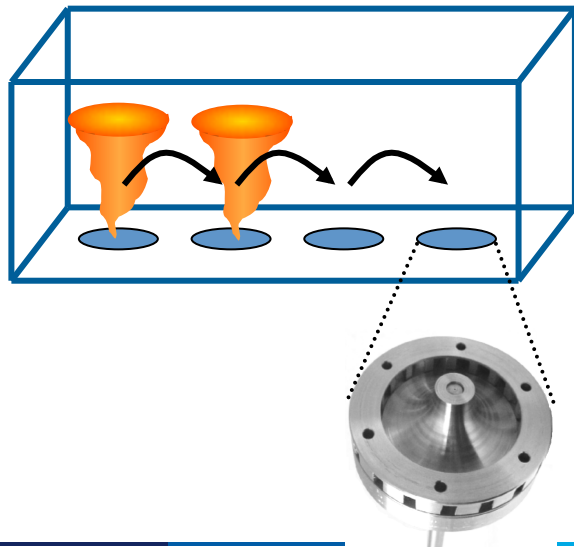
#### Phase III

light-around



# Allumage

- ◆ Exemple moteur aéro. Brûleur multi-injecteurs CORIA<sup>a</sup>



<sup>a</sup>Cordier et al, *Combust. Sci. and Tech.*, 2013

# Allumage

- ◆ Exemple moteur aéro.      Calcul brûleur multi-injecteurs<sup>a</sup>

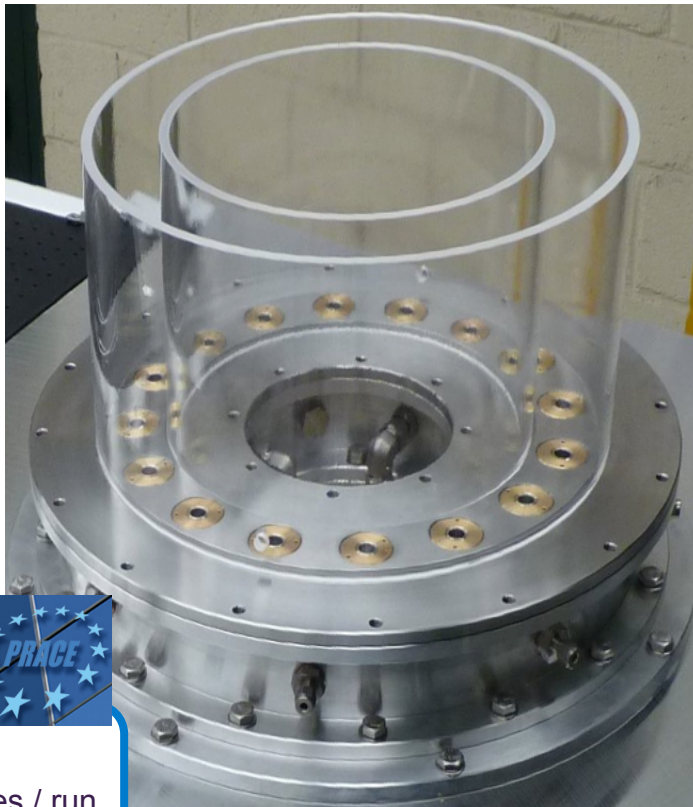


<sup>a</sup>Barre et al, *Combust. Flame*, 2014

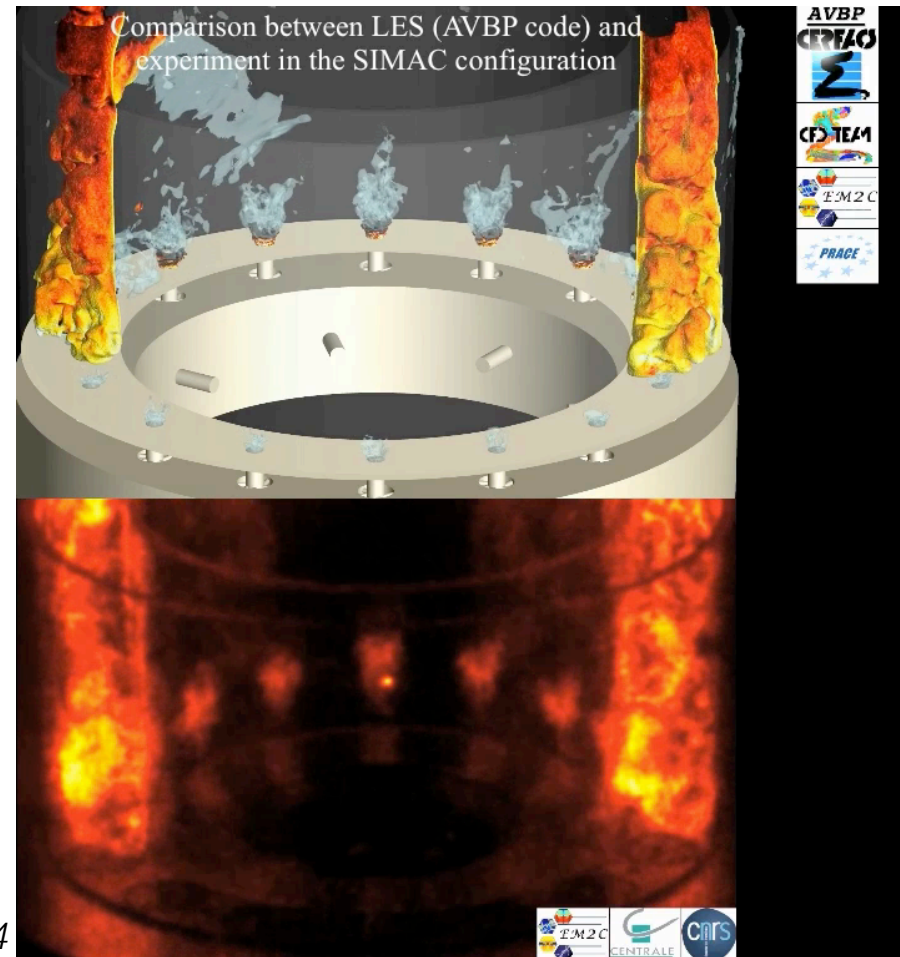
# Allumage

## ◆ Exemple moteur aéro.

## Calcul annulaire complet<sup>a</sup>



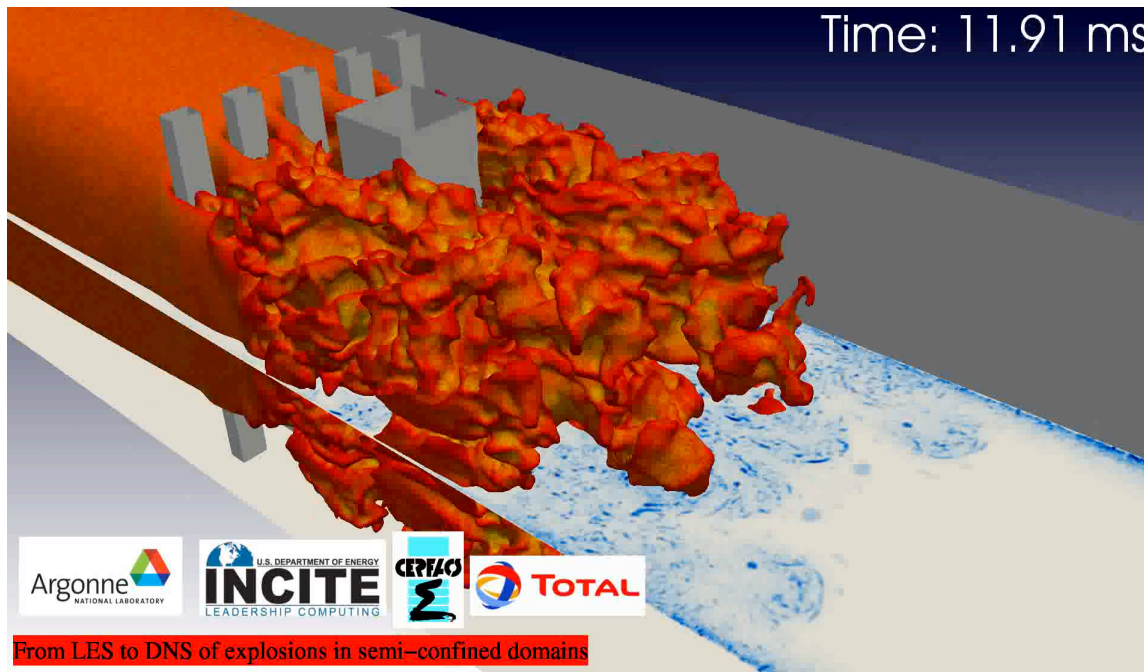
CURIE  
6144 cores / run  
**15M** CPU.h



<sup>a</sup>Philippe et al, Proc. Comb. Inst., 2014

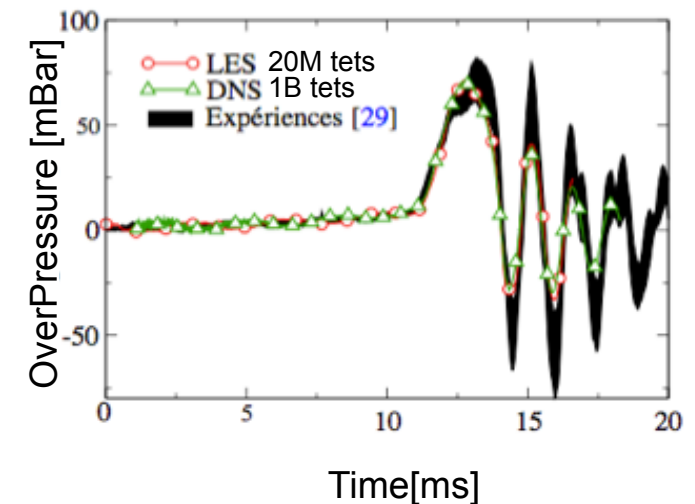
# Explosions

## ◆ Transition déflagration-détonation



Exp. Sydney, Masri et al<sup>a</sup>

Longueur 25cm



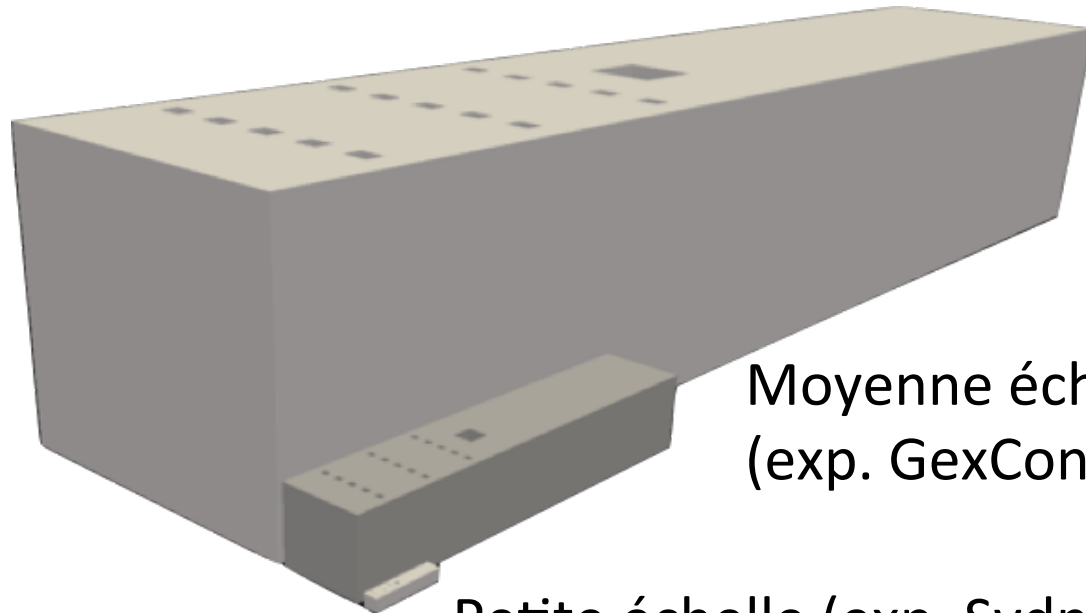
PhD of P. Quillatre (TOTAL Cifre)

- 1 file = 30 Gb (x2000 snapshots)
- Simulation d'un tir sur 32 k cœurs: 20 M CPUh sur BG-P
- Speed-up correct jusqu'à 131 072 cœurs

<sup>a</sup>Masri et al, *Exp. Thermal & Fluid Sci.*, 2000

# Explosions

## ◆ Transition déflagration-détonation



Grande échelle  
(exp. GexCon) - 6 m

Moyenne échelle  
(exp. GexCon) - 1.5 m

Petite échelle (exp. Sydney) - 25 cm

Peut-on passer à l'échelle?

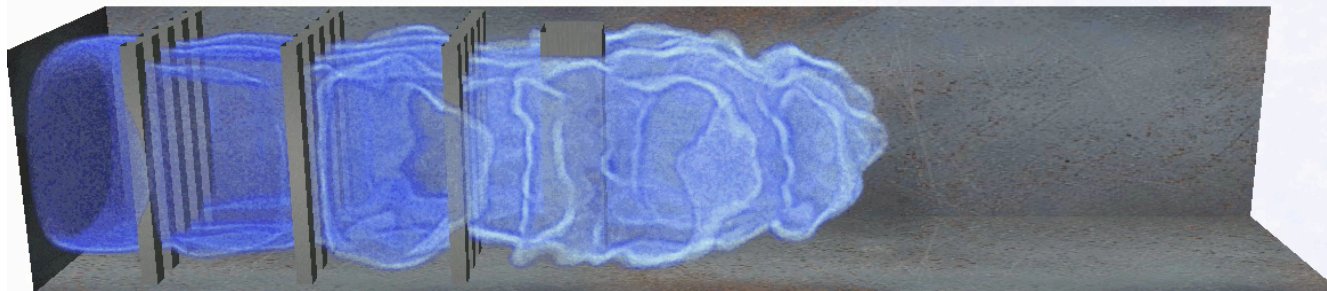
# Explosions

## ◆ Transition déflagration-détonation

Configuration 1.5m



**Expérience**



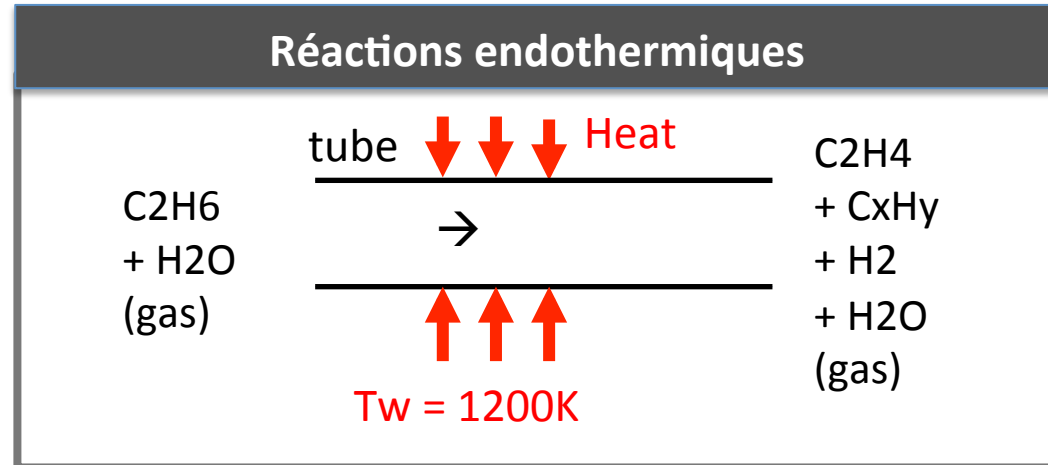
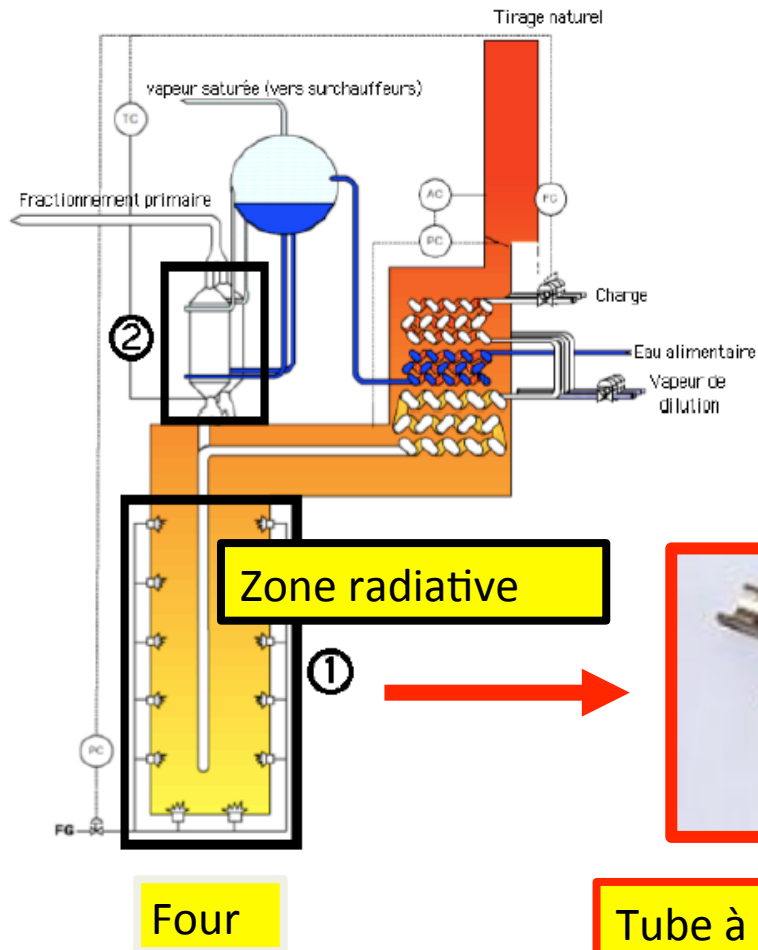
**Calcul LES**



Time: 58.0



# Une application « procédés »: le vapocraquage de l'éthane



Réactions de vapocraquage de C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> dans les tubes

Tube à nervure hélicoidale

- Amélioration de la sélectivité
- Diminution du cokage

PhD of M. Zhu (TOTAL)

# Vapocraquage de l'éthane

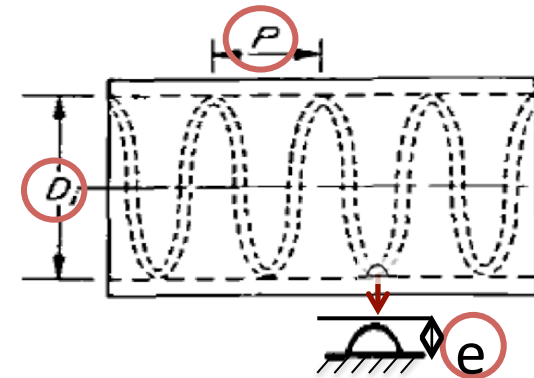
Les tubes nervurés peuvent augmenter le transfert de chaleur de deux façons:

- augmentation de la surface interne des tubes
- augmentation du coefficient de transfert de chaleur grâce à une intensité turbulente plus grande.

MAIS

- la perte de charge augmente

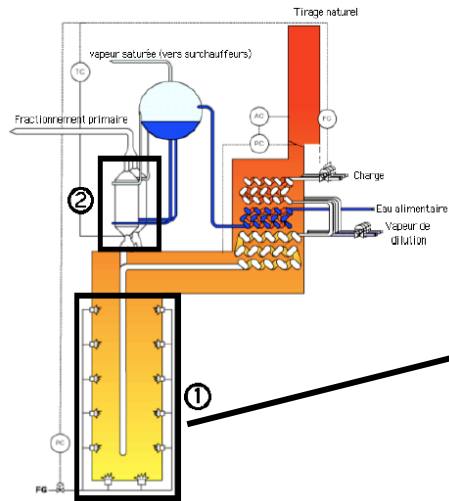
$e/D$ ↗: frottement ↗	Nusselt ↗
$p/D$ ↗: frottement ↘	Nusselt ↘



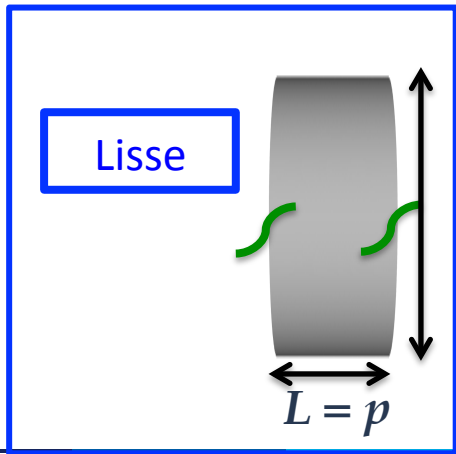
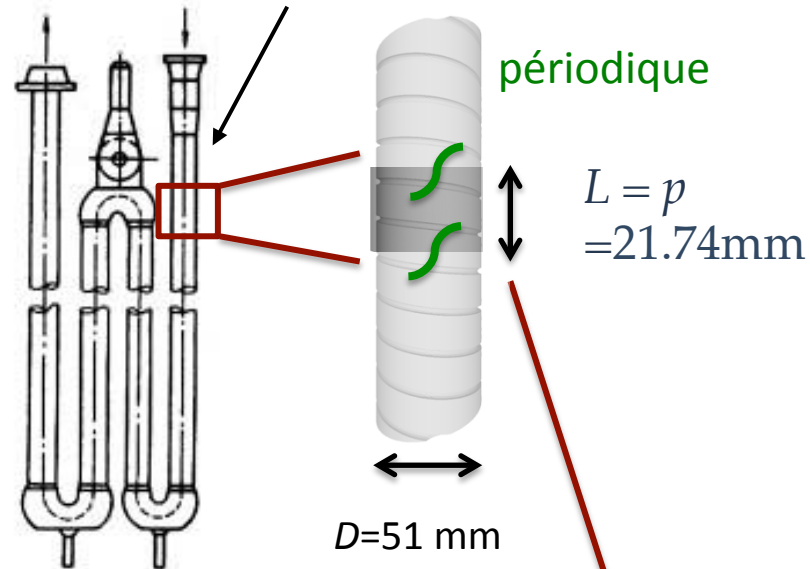
→ Utilisation de « wall-resolved Large Eddy Simulation » pour répondre à la question: « Quelle est l'efficacité d'un tube nervuré en termes de perte de charge, transfert de chaleur et conversion chimique de C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> en C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>? »

# Vapocraquage de l'éthane

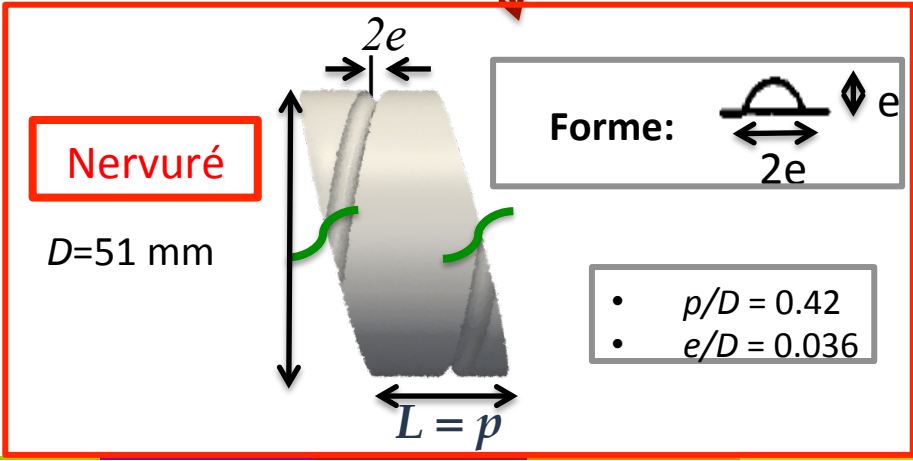
## ◆ Configuration



Tube: plusieurs mètres de long

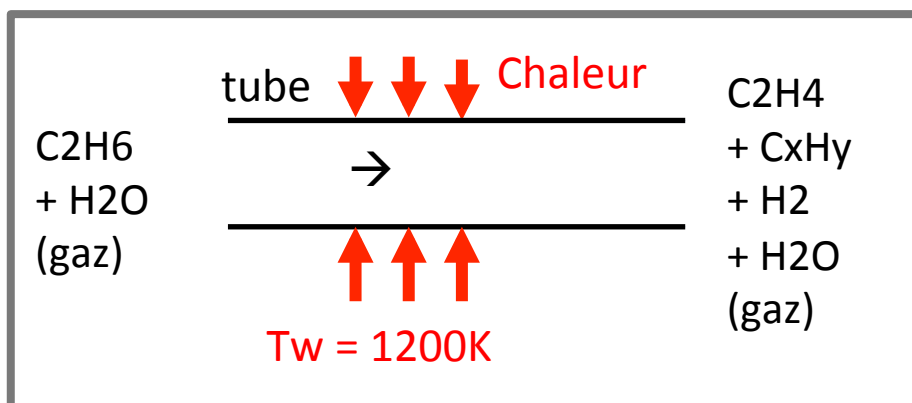


Comparaison



# Vapocraquage de l'éthane

## ◆ Conditions de fonctionnement



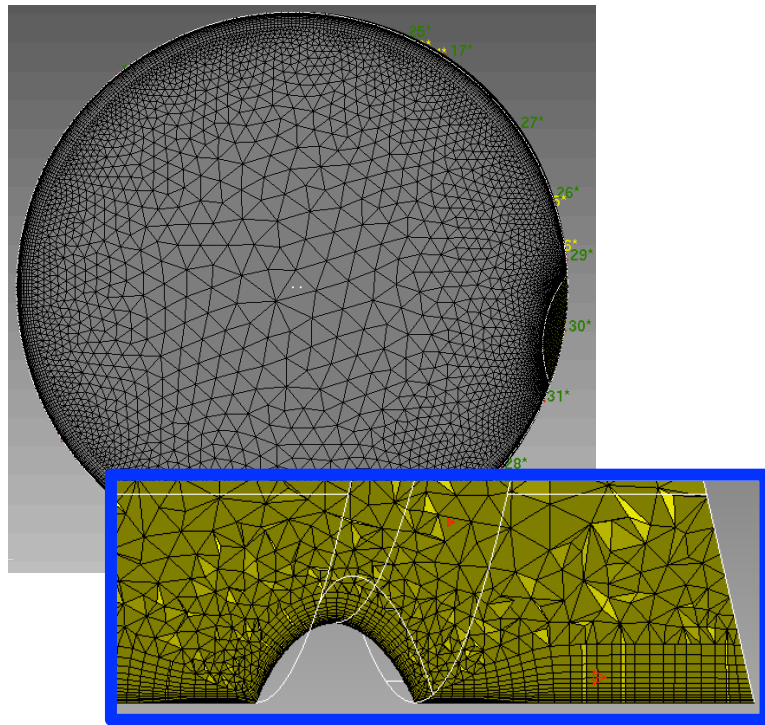
Composition à l'entrée (fraction massique)	74.1% C2H6 25.9% H2O
Reynolds	27 000
Pression	1 atm
Temperature parois	1200K
Temps de résidence	~0.5s

## Chimie réduite (fournie par Laboratorium voor Chemische Technologie)

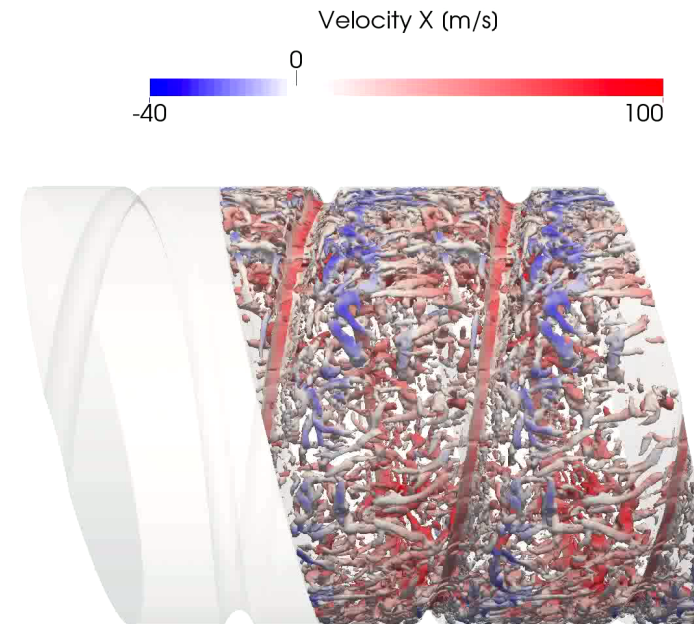
- 19 espèces:
  - H2 CH4 C2H2 C2H4 C2H6 C3H6 C4H8 C4H6 C4H10 H CH3 C2H3 C2H5 C3H7 1C4H9 2C4H9 C4-4 C3H5 H2O
- 32 réactions:
  - réaction principale:  $C_2H_6 + C_2H_3 \Rightarrow C_2H_5 + C_2H_4$

# Vapocraquage de l'éthane

- ◆ Isosurface instantanée de critère Q, coloré par la vitesse axiale



La couleur bleue correspond à un écoulement recirculant

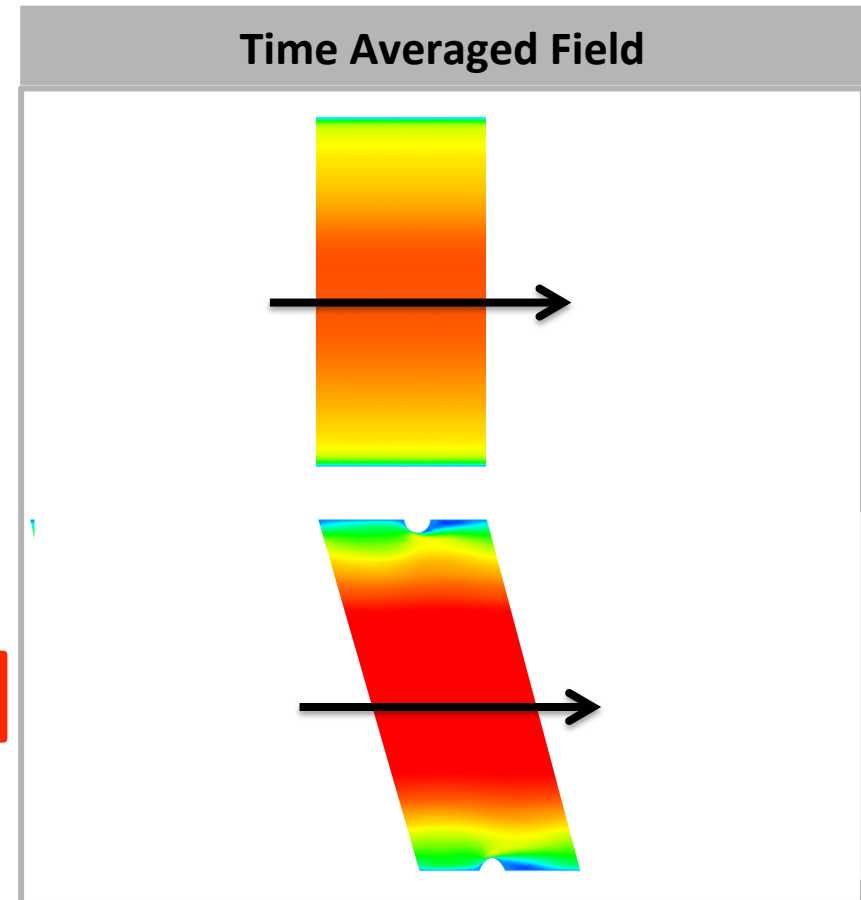
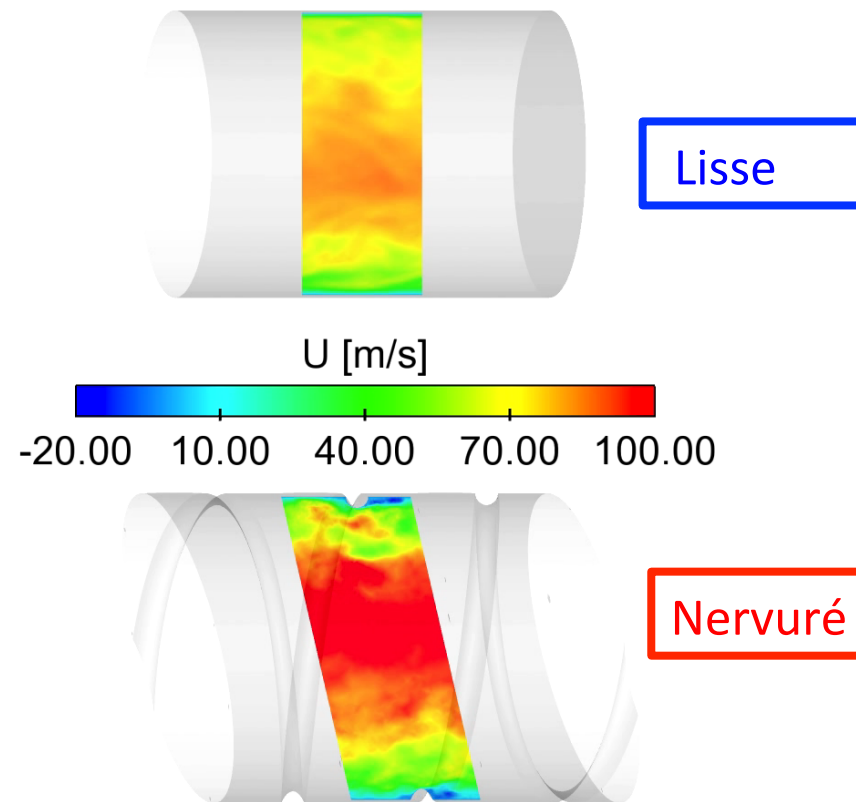


- Distance à la paroi du premier point (wall unit): 1 → pas de temps: 6e-8s
- 2.22M cellules → temps CPU/itération: 0.06s sur 1024 coeurs(Turing)
- Temps de calcul: 105 CPUh pour un temps convectif
- Temps physique total : 540 temps convectifs (190ms temps physique)

# Vapocraquage de l'éthane

## ◆ Vitesse axiale moyenne et instantanée

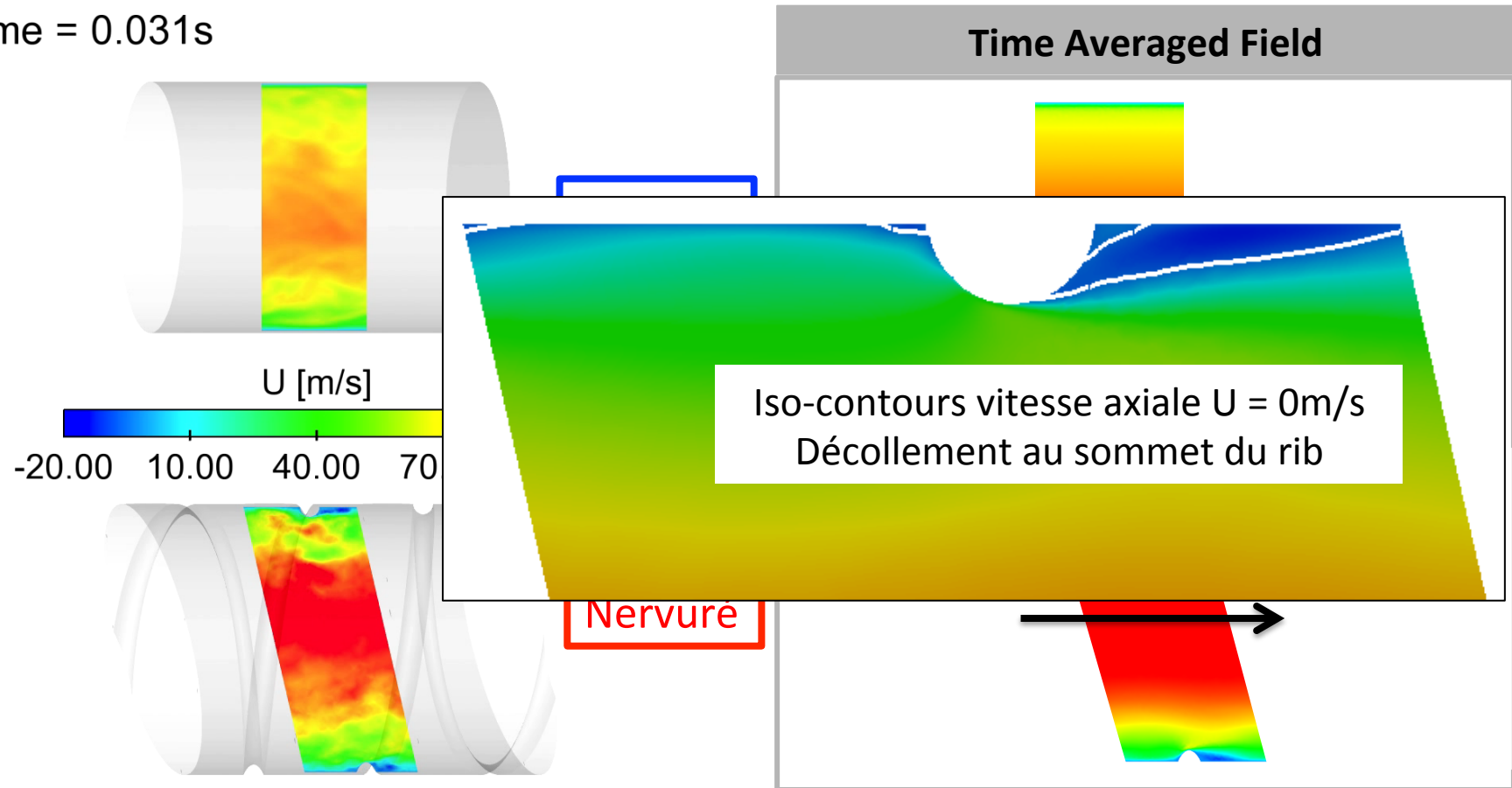
Time = 0.031s



# Vapocraquage de l'éthane

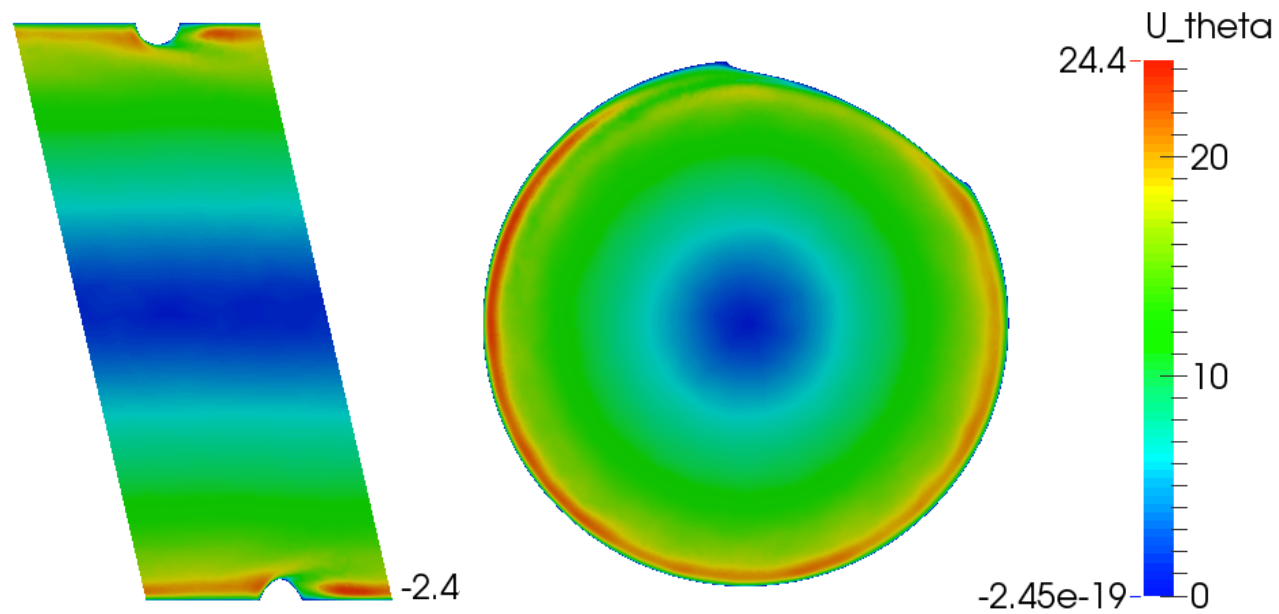
## ◆ Vitesse axiale moyenne et instantanée

Time = 0.031s



## Vapocraquage de l'éthane

- ◆ Vitesse azimuthale moyenne





# Vapocraquage de l'éthane

## ◆ Perte de charge

Balance equation for axial momentum

$$0 = \underbrace{- \oint P n_x dS}_{\text{Pressure drag}} + \underbrace{\oint \vec{\tau}_x \cdot \vec{n} dS}_{\text{Friction drag}} + \underbrace{\int S_{qdm} dV}_{\text{Total imposed force}}$$

- Tous les termes sont normalisés par  $\rho u_b^2 D^2$
- Les résultats sont exprimés en pourcentage du terme source imposé dans le tube lisse

# Vapocraquage de l'éthane

## ◆ Perte de charge

Balance equation for axial momentum

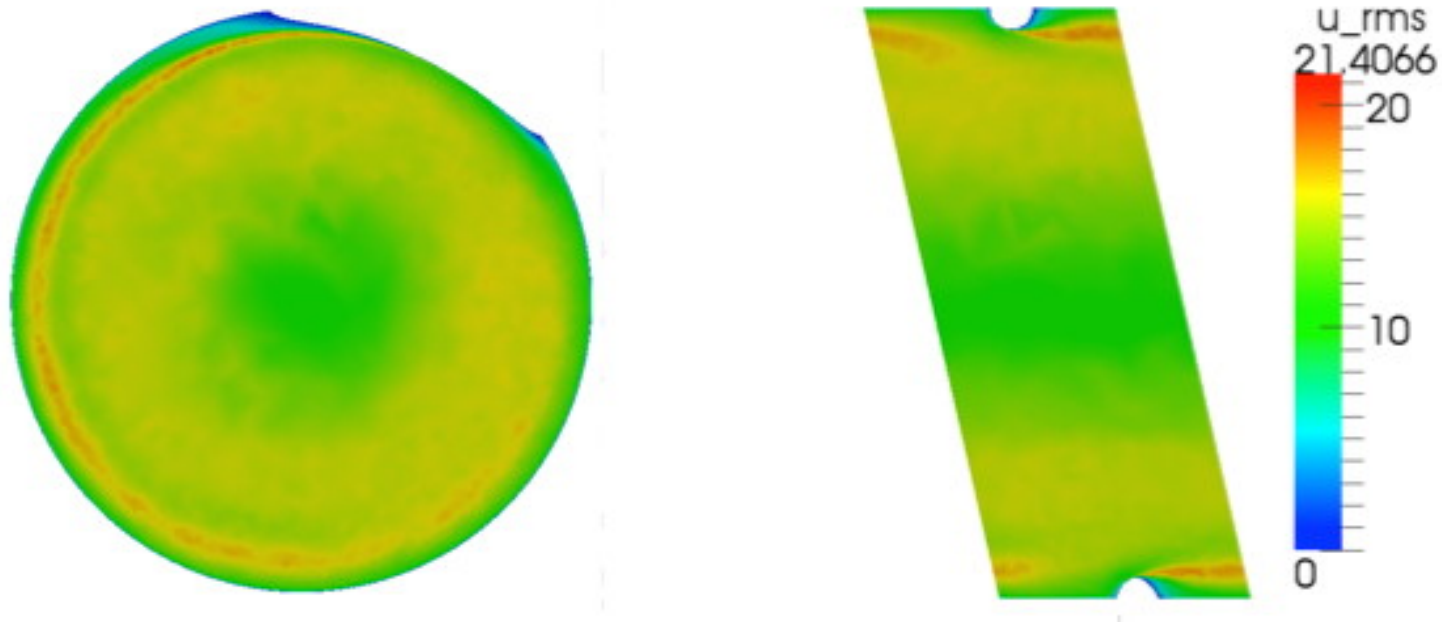
$$0 = \underbrace{- \oint P n_x dS}_{\text{Pressure drag}} + \underbrace{\oint \vec{\tau}_x \cdot \vec{n} dS}_{\text{Friction drag}} + \underbrace{\int S_{qdm} dV}_{\text{Total imposed force}}$$

- Tous les termes sont normalisés par  $\rho u_b^2 D^2$
- Les résultats sont exprimés en pourcentage du terme source imposé dans le tube lisse

	Pressure drag	Friction drag	Total drag	Total imposed force
R51 Y1	2.33e-2 (658%)	0.97e-3 (27%)	2.42e-2 (685%)	2.36e-2 (668%)
R51 Y10	2.56e-2 (725%)	1.33e-3 (37%)	2.70e-2 (762%)	2.34e-2 (662%)
S51 Y1	0 (0%)	3.54e-3 (100%)	3.54e-3 (100%)	3.534e-3 (100%)

## Vapocraquage de l'éthane

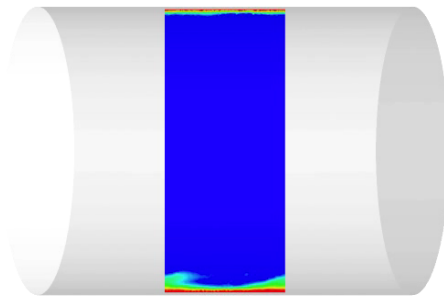
- ◆ Vitesse axiale fluctuante



# Vapocraquage de l'éthane

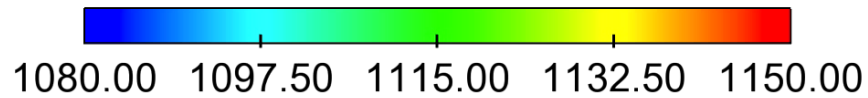
## ◆ Température instantanée

Time = 0.031s

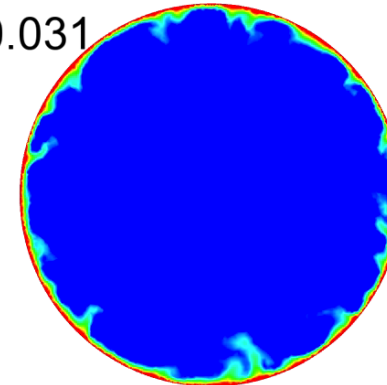


Lisse

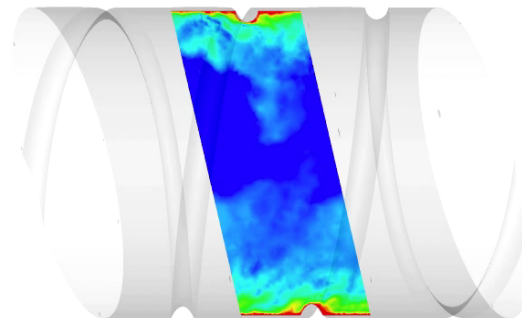
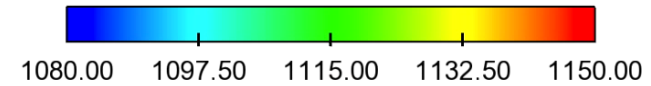
Temperature [K]



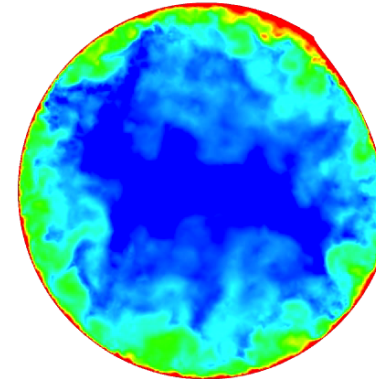
Time = 0.031



Temperature [K]



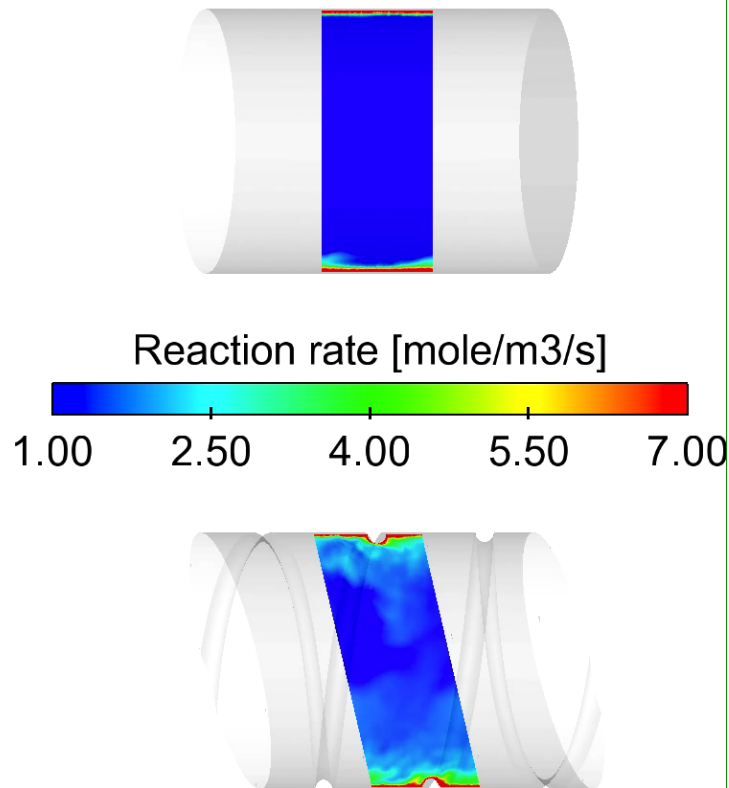
Nervuré



# Vapocraquage de l'éthane

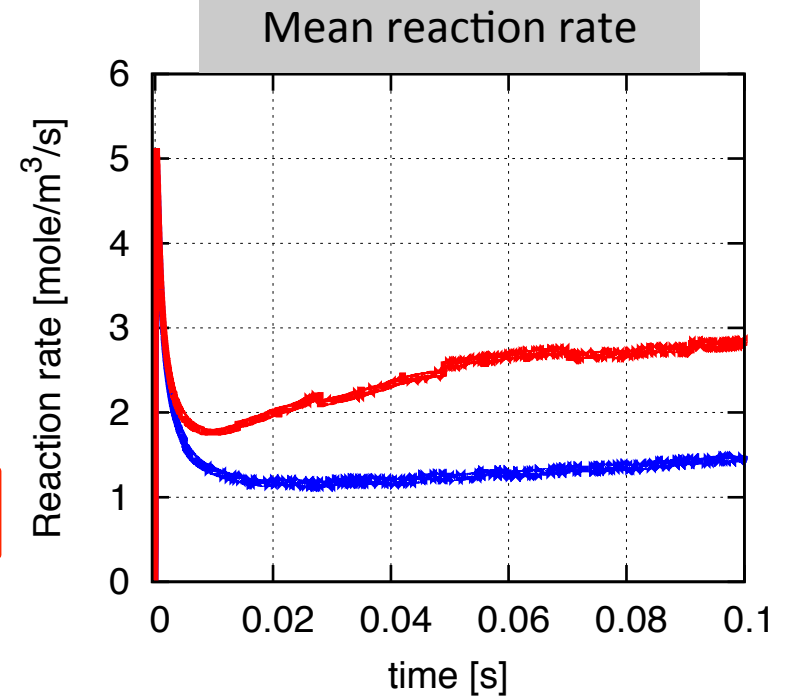
## ◆ Taux de réaction

Time = 0.031s



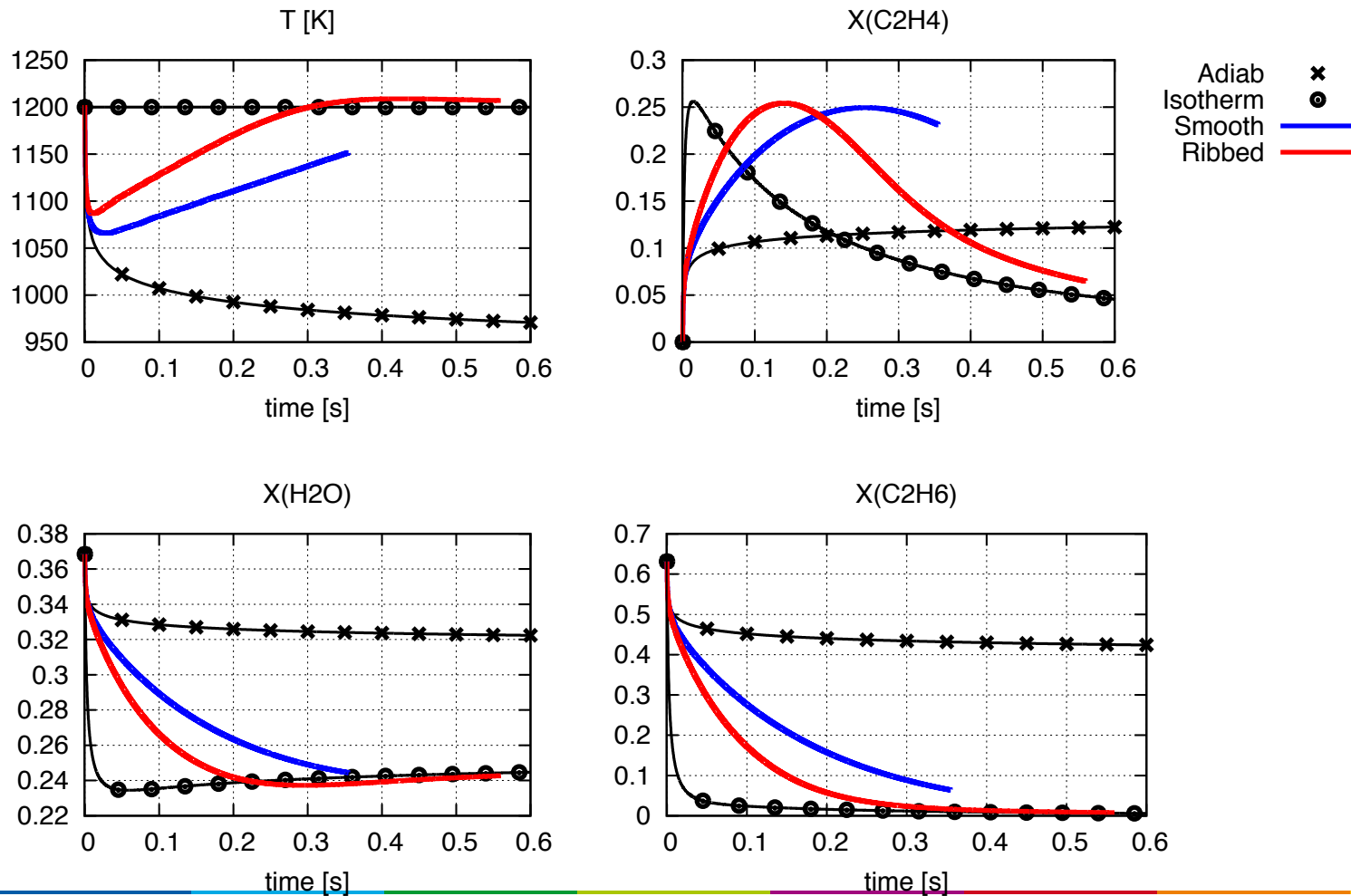
Lisse

nervuré



# Vapocraquage de l'éthane

## ◆ Effet des nervures



# Conclusions

## La simulation aux grandes échelles

- ◆ est un outil puissant et efficace pour le calcul des écoulements réactifs en configurations réelles;
- ◆ apporte une meilleure compréhension des écoulements réactifs et des réponses inédites à des questions encore ouvertes;
- ◆ nécessite une efficacité de calcul maximale sur machines massivement parallèles.